



*Ministerio de Educación y Deportes  
Universidad Tecnológica Nacional  
Rectorado*

## **APRUEBA CURSO DE ACTUALIZACIÓN DE POSGRADO**

Buenos Aires, 15 de septiembre de 2016

VISTO la Resolución Nº 132/2016 del Consejo Directivo de la Facultad Regional San Rafael, a través de la cual solicita la aprobación y autorización de implementación del Curso de Actualización de Posgrado "Modelado y Simulación molecular para ciencias e ingeniería" y,

### **CONSIDERANDO:**

Que el Curso propuesto responde a la necesidad de brindar a docentes y graduados de la Universidad, conocimientos científicos actualizados relativos a la modelación y simulación molecular como herramientas para el diseño de procesos y productos innovadores.

Que la Facultad Regional San Rafael cuenta con un plantel de profesores de elevado nivel académico y profesional, además de una prolongada y amplia experiencia en el dictado de cursos y seminarios vinculados al propuesto.

Que la Comisión de Posgrado de la Universidad ha analizado los antecedentes que acompañan la solicitud y avala la presentación, y la Comisión de Ciencia, Tecnología y Posgrado recomienda su aprobación.

Que el dictado de la medida se efectúa en uso de las atribuciones otorgadas por el Estatuto Universitario.

A handwritten signature in dark ink, appearing to be a stylized letter 'P' followed by a flourish.



Ministerio de Educación y Deportes  
Universidad Tecnológica Nacional  
Rectorado

Por ello,

EL CONSEJO SUPERIOR DE LA UNIVERSIDAD TECNOLÓGICA NACIONAL

ORDENA:

ARTÍCULO 1°.- Aprobar el currículum del Curso de Actualización de Posgrado "Modelado y Simulación molecular para ciencias e ingeniería" que figura en el Anexo I y es parte integrante de la presente Ordenanza.

ARTICULO 2°.- Autorizar el dictado del mencionado Curso en la Facultad Regional San Rafael con el Cuerpo Docente que figura en el Anexo II y es parte integrante de la presente Ordenanza.

ARTÍCULO 3°.- Regístrese. Comuníquese y archívese.



ORDENANZA N° 1553

UTN
SCTYP
f.c.r.
l.p.

Ing. HÉCTOR CARLOS BROTO  
RECTOR

A.U.S. RICARDO F. O. SALLER  
Secretario del Consejo Superior



Ministerio de Educación y Deportes  
Universidad Tecnológica Nacional  
Rectorado

ORDENANZA Nº 1553

ANEXO I

## CURSOS DE ACTUALIZACIÓN DE POSGRADO

### MODELADO Y SIMULACIÓN MOLECULAR PARA CIENCIAS E INGENIERÍA

#### A. FUNDAMENTACIÓN

La formación de recursos humanos capaces de diseñar de forma racional nuevos productos y/o procesos es clave para el desarrollo sostenido del aparato productivo regional. Esto conlleva originar y entrenar en el profesional la habilidad personal para la creación de conocimiento e innovación en el campo científico tecnológico. Este es el primer paso hacia la vinculación y transferencia de tecnología hacia la industria. Por citar ejemplos, el desarrollo de materiales avanzados o la biotecnología son casos testigos de vanguardia en innovación, los cuales tienen aplicaciones directas en distintos campos estratégicos como la ingeniería biomédica, alimentos, petroquímica, etc.

En el contenido curricular y experiencia laboral tradicional de las carreras de ingeniería se estudian los procesos con un enfoque principalmente macroscópico cinético y/o termodinámico. Tal enfoque es una herramienta evidentemente muy poderosa para la industria. Con el advenimiento de la nanotecnología, los procesos se estudian y transforman a nivel atómico-molecular, lo cual extiende enormemente las posibilidades para innovar con un producto. Con este curso se espera ampliar y profundizar la visión de tales procesos, introduciendo al graduado en el nivel nanoscópico y mesoscópico donde los procesos se originan, amortiguan o amplifican, mediante las interacciones moleculares y las condiciones ambientales. La mecánica estadística conecta la visión microscópica con la macroscópica para explicar la observación experimental macroscópica a través de la conducta e

A small, handwritten signature in the bottom left corner of the page.



Ministerio de Educación y Deportes  
Universidad Tecnológica Nacional  
Rectorado



interacciones en el mundo microscópico. Este entendimiento conlleva la oportunidad de evaluar, explicar y predecir donde y como un proceso es posible. Y por lo tanto, también ayuda a modificar racionalmente los componentes o pasos de un proceso para concretar el objetivo planteado en el desarrollo tecnológico.

## B. OBJETIVOS

### Objetivos Generales:

- Introducir a los graduados en la visión microscópica de interacción entre átomos, moléculas e iones.
- Comprender la fundamentación de la simulación computacional, su funcionamiento y alcance.
- Estudiar diferentes sistemas fisicoquímicos aplicados usualmente en la industria, aumentando en grado de dificultad para construir y entender paso a paso los conceptos y leyes que gobiernan tales sistemas.

### Objetivos Particulares:

- Comprender que la observación macroscópica de un proceso emerge del promedio de un número enorme de estados que son el fruto del balance de fuerza a escala microscópica.
- Modelar sistemas con grado de dificultad creciente, comenzando en el gas ideal y terminando en biomacromoléculas.
- Incorporar la lógica de programación, para escribir algoritmo (desde cero) para lograr reproducir el sistema mediante el modelo elegido.
- Comparar los resultados obtenidos con la simulación, con los teóricos y experimentales.
- Validar las diferentes teorías a base de la comparación con los resultados exactos obtenidos con la simulación.



Ministerio de Educación y Deportes  
Universidad Tecnológica Nacional  
Rectorado



- Entender la conducta natural de los sistemas, para poder modificarlos inteligentemente.

### C. CONTENIDOS MÍNIMOS

#### Capítulo 1: El mundo microscópico

Elementos de mecánica clásica. Termodinámica. Gas ideal y sus postulados. Potenciales termodinámicos. Leyes de la termodinámica. Transiciones de fase. Mundo microscópico. Fuerzas intermoleculares. Categorización de fuerzas intermoleculares. Modelos moleculares átomo por átomo, grano grueso y red. Fluido de esferas rígidas. Función de distribución radial. Entorno Linux y elementos de programación en Fortran.

#### Capítulo 2. Mecánica estadística de sistemas simples:

Elementos de Mecánica Estadística. Espacio de las fases. Ensamblés microcanónico, canónico, gran canónico. Función de partición. Observables. Gas ideal. Conexión con la termodinámica. Factorización de la función partición. Balance detallado. Método de Monte Carlo (MC). Fluido de Lennard-Jones. Transiciones de Fase del fluido de Lennard-Jones. Caracterización de la estructura intermolecular mediante función de distribución radial. Modelo de gas de red. Separación y purificación de mezclas gaseosas.

#### Capítulo 3. Mecánica estadística de soluciones de electrolitos fuertes.

Soluciones de electrolitos fuertes. Modelo primitivo para soluciones iónicas. Longitud de Bjrum. Teoría de Debye-Huckel y ecuación de Poisson-Boltzmann. Longitud inversa de Debye y su interpretación física sobre el alcance espacial de la interacción electrostática. Aplicación de Monte Carlo a una solución iónica. Simulación computacional de una superficie cargada en presencia de una solución de electrolito fuerte. Doble capa eléctrica.



Estabilidad coloidal debida a repulsión electrostática.



Ministerio de Educación y Deportes  
Universidad Tecnológica Nacional  
Rectorado



#### **Capítulo 4. Mecánica estadística de polímeros y polielectrolitos.**

Mecánica estadística de macromoléculas. Polímero ideal. Polímero autoexcluyente. Leyes escalares. Simulación computacional de polímeros y polielectrolitos. Condensación de Manning en polielectrolitos. Efecto de tamaño. Interacción de partículas coloidales (latex, bioglass, nanoarcillas) con polielectrolitos. ADN como paradigma de polielectrolito biológico. Encapsulación de ADN mediante la formación de complejos con quitosan.

#### **Capítulo 5. Macromoléculas de origen biológico.**

Niveles estructurales y plegamiento de proteína. Paradoja de Levintal. Embudos de energía. Relación entre estructura y función de proteínas. Aminoácidos titulables. Simulación computacional de los aspectos electrostáticos en proteínas. Inmovilización de enzimas. Absorción de proteínas anticongelantes sobre cristales de hielo. Purificación y/o inmovilización de proteínas mediante la formación de complejos Proteínas-Polielectrolitos. Absorción de polielectrolitos y proteínas sobre superficies cargadas.

#### **D. DURACIÓN:**

La carga horaria total del curso es de CUARENTA Y CINCO (45) horas.

#### **E. METODOLOGÍA:**

Las clases tendrán carácter teórico-prácticas. Se desarrollarán las actividades prácticas con el apoyo del uso de herramientas computacionales apropiadas para el desarrollo de las simulaciones previstas en el curso.

#### **F. EVALUACIÓN FINAL:**

Para la aprobación del curso será necesario cumplir con un 80 % de la asistencia, aprobar los trabajos prácticos y una evaluación final individual.



Ministerio de Educación y Deportes  
Universidad Tecnológica Nacional  
Rectorado

ORDENANZA N° 1553

ANEXO II

**CURSOS DE ACTUALIZACIÓN DE POSGRADO**  
**MODELADO Y SIMULACIÓN MOLECULAR PARA CIENCIAS E INGENIERÍA**  
**FACULTAD REGIONAL SAN RAFAEL**

**Docentes**

- NARAMBUENA, Claudio

Doctor en Química, Universidad Nacional de Córdoba

Licenciado en Química, Universidad Nacional de Córdoba

- SANCHEZ VARRETI, Fabricio Orlando

Doctor en Física, Universidad Nacional de San Luis

Magister en Ciencias de Superficie y Medios Porosos, especialización en Físico-Química de Superficies, Universidad Nacional de San Luis

A handwritten signature in black ink, appearing to be the name "Pablo A. Huél".

Ingeniero Químico, UTN - Facultad Regional San Rafael

-----